

В.І. Бойчук, І.В. Білінський, І.О. Шаклеїна

## Дисперсія коефіцієнта відбивання від інтерфейсу гетеросистеми одновимірних кристалів

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка  
вул. Івана Франка, 24, Дрогобич, 82100, Україна*

В даній роботі на основі моделі Кроніга-Пенні з  $\delta$ -подібними потенціалами досліджено тришарову наногетероструктуру, в якій біля меж поділу існує перехідний шар, відстань між крайніми атомами якого є параметром задачі і може змінюватись від нуля до двох сталих ґраток кристалів. Отримана точна формула для коефіцієнта відбивання  $R$ , з якої можна визначити залежність коефіцієнта  $R$  від хвильового вектора, величини перехідного шару та ширини моношару гетероструктури. Конкретні обчислення, проведені для гетеросистеми  $GaAs/AlAs/GaAs$ , показали, що використання наближення огибаючих та методу ефективної маси при малих значеннях хвильового вектора дає непогані результати, якщо використати граничні умови Гарісона при відповідним чином підібраних параметрах.

**Ключові слова:** гетероструктура, перехідний шар, модель Кроніга-Пенні, коефіцієнт відбивання.

*Стаття поступила до редакції 07.12.2006; прийнята до друку 14.09.2007.*

### Вступ

Протягом останнього часу інтенсивно досліджуються різні наноструктури, в яких теоретично та експериментально досліджуються електричні та оптичні властивості. Значне число робіт присвячено гетероструктурам  $GaAs/AlAs$ , в яких шари  $AlAs$  поміщено в кристалічне середовище  $GaAs$  [1-4]. Електронні властивості таких гетеросистем пов'язані з електронами  $\Gamma$ -долини зонного спектру.

Проблема проходження цих електронів через межу різних кристалів виникає в електроніці гетеропереходів та при дослідженні транспортних властивостей полікристалічних матеріалів [5-13]. Точний розв'язок даних проблем не можливий без великої кількості обчислень, для яких потрібно знати точний вигляд блохівський функцій складових матеріалів та швидкоспадних функцій біля інтерфейсу. Як правило, блохівські функції замінюються огибаючими функціями (плоскими хвилями) і використовується наближення ефективної маси. Звичайно, вважається, що огибаюча функція та її похідні мають бути неперервними на межі поділу [10-13]. В принципі, ці умови повинні впливати з обґрунтованого виразу для оператора струму в просторі огибаючих функцій.

Такий вираз повинен залежати від правильної форми оператора ефективної кінетичної енергії, що діє на огибаючі функції, і бути правильним в

області, де зонна структура швидко змінюється. Обґрунтування вигляду для цього оператора обговорювалось в літературі [5,12,13], але він не був в загальному виведений з перших принципів. Основні результати, отримані теорією, що ґрунтується на  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  моделі та при використанні наближення сильного зв'язку [14-16].

Наслідуючи Гарісона [5], можна використати умови неперервності електронного потоку, вважаючи неперервними  $\xi\Phi$  та  $(m\xi)^{-1}\nabla\Phi$ , де  $\Phi$  – огибаюча,  $m(x)$  – ефективна маса,  $\xi(x)$  – скалярний параметр, який за припущенням не сильно залежить від енергії біля краю зони кожного кристалу. Для одновимірних кристалів умови Гарісона в найбільш загальній формі ( $\beta\Phi$  та  $\alpha(\partial\Phi/\partial x)$  – неперервні) можуть бути оправдані тим, що ефективне рівняння Шредінгера, яке визначає огибаючі функції в кожному кристалі, є диференціальним рівнянням другого порядку і тому його розв'язки можна представити через два параметри ( $\alpha$  і  $\beta$ ). Зв'язок між цими параметрами можна встановити, виходячи зі сталості густини потоку ймовірності. Якщо вважати, що густина потоку ймовірності визначається формулою:

$$J_x = -\frac{\hbar}{2im} \left( \Phi^* \frac{\alpha \partial(\beta\Phi)}{\partial x} - \Phi \frac{\alpha \partial(\beta\Phi^*)}{\partial x} \right),$$

і використати наближення ефективної маси для енергетичного спектру електрону, то з неперервності

$J_x$  отримуємо неперервність  $\alpha \beta t$  впоперек межі поділу. Отже, дана проблема зводиться до визначення одного невідомого параметру ( $\xi$ ). В загальному випадку, така схема обчислень не обов'язково приведе до коректних результатів. Однак такий підхід широко використовується в багатьох публікаціях. Причому, досить часто параметр  $\xi$  приймають рівним одиниці. Хоч цей підхід не є строгим, його перевагою є те, що граничні умови визначаються через відому величину ефективної маси.

Як сказано вище, питання вибору та обґрунтування граничних умов, які накладаються на хвильову функцію електрона гетероструктури, досліджувались у багатьох роботах. Однак в більшості з них розглядалися прості гетероструктури з однією межею поділу, на якій всі величини, в тому числі й відстань між атомами, різко змінюються.

Метою даної роботи є розвиток теорії коефіцієнта відбивання подвійної гетероструктури з врахуванням перехідного шару біля меж поділу середовищ, в якому відстань між сусідніми атомами може змінюватись від нуля до двох сталих ґратки кристалів, на основі моделі Кроніґа-Пенні для  $\delta$ -подібних потенціалів, дослідження залежності коефіцієнта відбивання від хвильового вектора, величини перехідного шару та ширини бар'єру гетероструктури.

## I. Модель гетероструктури. Загальні форми

Гетероструктура складається з трьох кристалів. Зліва (область I) та справа (область III) знаходяться однакові напівбезмежні кристали. Внутрішня область (область II) відповідає іншому кристалу гетеросистеми. Модель гетероструктури вибрано у вигляді періодичного ряду  $\delta$ -функцій. Величина піків  $\delta$ -функції є різною для кристалів в областях I (III) та II. На межах поділу середовищ немає атомів, що дозволяє відокремити ефекти, які пов'язані з зонною структурою, від тих, які визначаються стрибкоподібною зміною потенціалу на межі. Кристали представлені рядами  $\delta$ -функцій з силою

$P_i$  та періодами  $d_i$  ( $i=1,2$ ). Варто відмітити, що на межах поділу елементарні комірки розміром  $b = b_1 + b_2$  містять атоми обох типів кристалів. Ці комірки порушують трансляційну симетрію, тому коефіцієнт відбивання є функцією їх розмірів. В реальних кристалах ситуація є більш складною тому, що біля межі поділу псевдопотенціал є спотвореним. Не обмежуючись у виборі величини, будемо однак вважати, що перехідний шар між кристалами не є великим:  $b < d_1 + d_2$ .

Виберемо систему координат таким чином, щоб ліва межа поділу знаходилась в точці  $x = 0$ . Тоді рівняння Шредінґера для комірки з цією межею запишемо в вигляді:

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} - P_i \delta(x \pm b) + V_{\pm} \right\} \Psi_{k_i}^{(i)} = E \Psi_{k_i}^{(i)}, \quad (1)$$

де  $m_0$  – маса вільного електрона. В рівності (1) знак «плюс» та  $i=1$  відповідає області зліва від інтерфейсу, а знак «мінус» та  $i=2$  відповідає другому кристалу, тому  $V_+ = 0$ ,  $V_- = -V$ .

Аналогічне рівняння можна записати для правої комірки з межею поділу  $x = L$ ;

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} - P_2 \delta(x - (L - b_2)) - V \right\} \Psi_{k_2}^{(2)} = E \Psi_{k_2}^{(2)} \quad x < L,$$

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} - P_1 \delta(x - (L - b_1)) \right\} \Psi_{k_1}^{(3)} = E \Psi_{k_1}^{(3)}, \quad x > L \quad (2)$$

В області I та III кристали напівобмежені, тому функції  $\Psi_{k_1}^{(1)}$  та  $\Psi_{k_1}^{(3)}$  є блохівськими функціям, і для них справедливі наступні умови:

$$\Psi_{k_1}^{(1)}(0) = e^{ik_1 d_1} \Psi_{k_1}^{(1)}(-d_1),$$

$$\Psi_{k_1}^{(3)}(L) = e^{-ik_1 d_1} \Psi_{k_1}^{(3)}(L + d_1). \quad (3)$$

Аналогічні співвідношення можна записати для похідних від хвильових функцій. Крім того, необхідно врахувати, що в точках полюсів  $\delta$ -функції Дірака похідна хвильової функції стрибкоподібно змінюється [17]. Зокрема,

$$\Psi_{k_1}^{(1)}(-b_1 + 0) - \Psi_{k_1}^{(1)}(-b_1 - 0) = -\frac{2m_0 P_1}{\hbar^2} \Psi_{k_1}^{(1)}(-b_1),$$

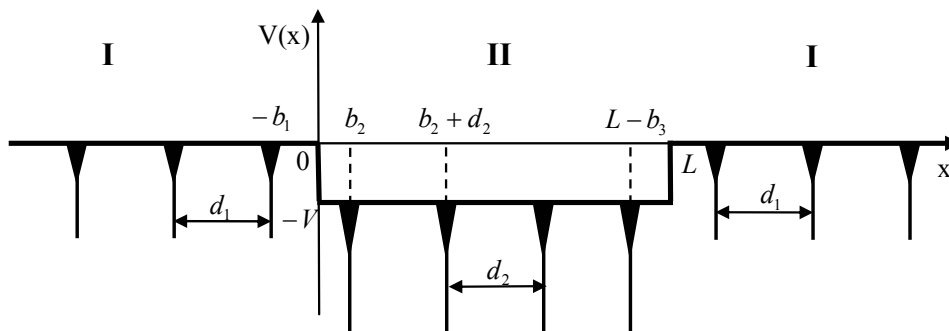


Рис. 1. Модель гетероструктури.

$$\begin{aligned} \Psi_{k_1}^{(3)'}(L+b_1+0) - \Psi_{k_1}^{(3)'}(L+b_1-0) = \\ = -\frac{2m_0 P_1}{\hbar^2} \Psi_{k_1}^{(3)}(L+b_1) \end{aligned} \quad (4)$$

Використовуючи трансляційні властивості хвильових функцій, можна одержати дисперсійне рівняння для електрона в областях I та III:

$$\cos(k_1 d_1) = \cos(q_1 d_1) - U_1 \frac{\sin(q_1 d_1)}{q_1 d_1}, \quad (5)$$

де  $U_1 = \frac{m_0 P_1 d_1}{\hbar^2}$ ,  $q_1 = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}$ ,  $k_1$  – хвильовий вектор електрона.

Нормовані хвильові функції крайніх комірок I та III кристалів можна записати у вигляді:

$$\Psi_{k_1}^{(1)}(x) = A_{k_1} \left[ \frac{1 - e^{-i(q_1+k_1)d_1}}{1 - e^{-i(q_1-k_1)d_1}} e^{iq_1(x+b_1)} + e^{-iq_1(x+b_1)} - (1 - e^{-i(q_1+k_1)d_1}) e^{iq_1|x+b_1|} \right] \quad (6)$$

$$\Psi_{k_1}^{(3)}(x) = A_{k_1} \left[ \frac{1 - e^{-i(q_1+k_1)d_1}}{1 - e^{-i(q_1-k_1)d_1}} e^{iq_1(x-L-b_1)} + e^{-iq_1(x-L-b_1)} - (1 - e^{-i(q_1+k_1)d_1}) e^{iq_1|x-L-b_1|} \right] \quad (7)$$

В загальному випадку хвильову функцію в першому та третьому кристалах можна записати наступним чином:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= \Psi_{k_1}^{(1)}(x) + r \Psi_{-k_1}^{(1)}(x), \\ \Psi_3(x) &= t \Psi_{k_1}^{(3)}(x). \end{aligned} \quad (9)$$

Залежно від кількості атомів ( $N$ ) в другому кристалі гетеросистеми можна знайти хвильову функцію для всієї області  $\Psi_{q_2}^{(2)}(x)$  (де  $q_2 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(E+V)}$ ), яка для  $N > 1$  має досить громіздкий вигляд.

Далі використано умови зшивання функцій  $\Psi_1(x)$  і  $\Psi_{q_2}^{(2)}(x)$  в точці  $x=0$  та  $\Psi_{q_2}^{(2)}(x)$  і  $\Psi_3(x)$  в точці  $x=L$ . З цих умов можна визначити всі невідомі коефіцієнти, в тому числі і амплітуду коефіцієнта відбивання:

$$r = \frac{\Psi_{k_1}^{(1)}(0) [\gamma_N \varphi_{21}'(0) + \varphi_{22}'(0)] - \Psi_{k_1}^{(1)'}(0) [\gamma_N \varphi_{21}(0) + \varphi_{22}(0)]}{\Psi_{-k_1}^{(1)'}(0) [\gamma_N \varphi_{21}(0) + \varphi_{22}(0)] - \Psi_{-k_1}^{(1)}(0) [\gamma_N \varphi_{21}'(0) + \varphi_{22}'(0)]} \quad (10)$$

де

$$\begin{aligned} \varphi_{\begin{smallmatrix} 21 \\ 22 \end{smallmatrix}}^{(\pm)}(x) &= e^{\{\pm\}iq_2(x-b_2)} - \frac{U_2}{U_2 + iq_2 d_2} e^{iq_2|x-b_2|}, \\ U_2 &= \frac{m_0 P_2 d_2}{\hbar^2}. \end{aligned}$$

Коефіцієнти  $\gamma_n$  задовольняють наступне рекурентне співвідношення:

$$\gamma_N = \frac{\gamma_{N-1} D_1 + D_2}{\gamma_{N-1} D_3 + D_4}, \quad N > 1,$$

$$\Psi_{k_2}^{(2)}(x) = A_{k_2} \left[ \frac{1 - e^{-i(q_2+k_2)d_2}}{1 - e^{-i(q_2-k_2)d_2}} e^{iq_2(x-b_2)} + e^{-iq_2(x-b_2)} - (1 - e^{-i(q_2+k_2)d_2}) e^{iq_2|x-b_2|} \right], \quad (12)$$

$$0 \leq x < d_2$$

$$\gamma_1 = \frac{\varphi_{22}'(d_2) \Psi_{k_1}^{(3)}(L) - \varphi_{22}(d_2) \Psi_{k_1}^{(3)'}(L)}{\varphi_{21}(d_2) \Psi_{k_1}^{(3)'}(L) - \varphi_{21}'(d_2) \Psi_{k_1}^{(3)}(L)},$$

$$\text{де } D_1 = \begin{vmatrix} \varphi_{21}(0) & \varphi_{22}(d_2) \\ \varphi_{21}'(0) & \varphi_{22}'(d_2) \end{vmatrix},$$

$$D_2 = \begin{vmatrix} \varphi_{22}(0) & \varphi_{22}(d_2) \\ \varphi_{22}'(0) & \varphi_{22}'(d_2) \end{vmatrix},$$

$$D_3 = \begin{vmatrix} \varphi_{21}(0) & \varphi_{21}(d_2) \\ \varphi_{21}'(0) & \varphi_{21}'(d_2) \end{vmatrix},$$

$$D_4 = \begin{vmatrix} \varphi_{22}(0) & \varphi_{21}(d_2) \\ \varphi_{22}'(0) & \varphi_{21}'(d_2) \end{vmatrix}.$$

Варто зауважити, що формула (10) для коефіцієнта  $r$  одержана в рамках вибраної моделі без будь-яких наближень. Знаючи  $r$ , можна визначити коефіцієнт відбивання та проходження заряду гетеросистеми:

$$R = |r|^2, \quad T = 1 - R. \quad (11)$$

Якщо область II гетероструктури містить велику кількість атомів, можна знехтувати відсутністю трансляційної симетрії та використати модель Кроніга-Пенні. Отже, якщо ця область має розмір  $L = N d_2$  ( $N \gg 1$ ), то хвильову функцію першої комірки даної області можна записати у вигляді:

Для останньої комірки хвильову функцію можна знайти на основі трансляційної властивості блохівської функції. Загальний вигляд хвильової функції для цієї області можна представити формулою:

$$\Psi_2(x) = p\Psi_{k_2}^{(2)}(x) + f\Psi_{-k_2}^{(2)}(x). \quad (13)$$

Використовуючи граничні умови:

$$\begin{aligned} \Psi_{k_1}^{(1)}(0) + r\Psi_{-k_1}^{(1)}(0) &= p\Psi_{k_2}^{(2)}(0) + f\Psi_{-k_2}^{(2)}(0), \\ p\Psi_{k_2}^{(2)}(L) + f\Psi_{-k_2}^{(2)}(L) &= t\Psi_{k_1}^{(3)}(L), \end{aligned} \quad (14)$$

можна отримати вираз для коефіцієнта відбивання  $r$ :

$$r = \frac{\Psi_{k_1}^{(1)}(0) [\mu \Psi_{k_2}^{(2)'}(0) + \Psi_{-k_2}^{(2)'}(0)] - \Psi_{k_1}^{(1)'}(0) [\mu \Psi_{k_2}^{(2)}(0) + \Psi_{-k_2}^{(2)}(0)]}{\Psi_{-k_1}^{(1)'}(0) [\mu \Psi_{k_2}^{(2)}(0) + \Psi_{-k_2}^{(2)}(0)] - \Psi_{-k_1}^{(1)}(0) [\mu \Psi_{k_2}^{(2)'}(0) + \Psi_{-k_2}^{(2)'}(0)]}, \quad (15)$$

де введено наступне позначення:

$$\mu = \frac{\Psi_{-k_2}^{(2)'}(0)\Psi_{k_1}^{(3)}(L) - \Psi_{-k_2}^{(2)}(0)(d_2)\Psi_{k_1}^{(3)'}(L)}{\Psi_{k_2}^{(2)}(0)\Psi_{k_1}^{(3)'}(L) - \Psi_{k_2}^{(2)'}(0)\Psi_{k_1}^{(3)}(L)} e^{-2ik_2L}.$$

Коефіцієнт відбивання  $R = |r|^2$ , знайдений на основі формули (16) можна порівняти з точним виразом (11) і проаналізувати, при яких значеннях  $L$  одержуємо близькі результати. Це дає можливість встановити критерії використання наближення безмежного кристалу для області II гетероструктури.

Хвильові функції Блоха кристалів, що утворюють реальні гетероструктури, є невідомими. Тому, як правило, використовують наближення огинаючих функцій. У нашому випадку огинаюча матиме вигляд:

$$\Phi(x) = \begin{cases} \Phi_1(x), & x < 0 \\ \Phi_2(x), & 0 < x < L \\ \Phi_3(x), & x > L, \end{cases}$$

$$\text{де } \Phi_1(x) = e^{ik_1x} + r e^{-ik_1x},$$

$$\Phi_2(x) = A e^{ik_2x} + B e^{-ik_2x}, \quad (16)$$

$$\Phi_3(x) = t e^{ik_1(x-L)}.$$

Функції  $\Phi_i(x)$  ( $i = 1, 2, 3$ ) є лінійними комбінаціями плоских хвиль, які є розв'язками рівняння Шредінгера для гамільтоніанів, що описують стани біля країв зони  $E_n^{(i)}$  в наближенні ефективних мас:

$$H^{(i)} = E_n^{(i)} - \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (17)$$

Граничні умови типу (14) для блохівської функції та її похідної ведуть до неперервності густини потоку ймовірності на межах поділу. Ці умови, однак, не можна застосовувати для огинаючих. Часто використовують умови неперервності, в тому числі і

$$\text{на межах поділу, функцій } \Phi \text{ та } \frac{1}{m} \frac{\partial \Phi}{\partial x}.$$

Більш загальні умови, що накладаються на огинаючі кристалів гетероструктури, запропоновано Гарісоном [5]:

$$\beta_1 \Phi_1(0) = \beta_2 \Phi_2(0)$$

$$\beta_2 \Phi_2(L) = \beta_1 \Phi_3(L)$$

$$\alpha_1 \frac{\partial \Phi_1}{\partial x} \Big|_{x=0} = \alpha_2 \frac{\partial \Phi_1}{\partial x} \Big|_{x=0} \quad (18)$$

$$\alpha_2 \frac{\partial \Phi_2}{\partial x} \Big|_{x=L} = \alpha_1 \frac{\partial \Phi_3}{\partial x} \Big|_{x=L}$$

З неперервності потоку ймовірності в наближенні ефективної маси можна отримати наступний зв'язок між параметрами:

$$\alpha_1 \beta_1 m_1 = \alpha_2 \beta_2 m_2. \quad (19)$$

Якщо підставити (16) в (18), отримуємо вираз для коефіцієнта  $r$ :

$$r = \frac{2i(a^2\eta^2 - c^2)\sin k_2L}{-4ca\eta\cos k_2L + 2i(a^2\eta^2 + c^2)\sin k_2L}. \quad (20)$$

$$\text{де } c = \frac{\beta_1}{\beta_2}; \quad a = \frac{\alpha_1}{\alpha_2}; \quad \eta = \frac{k_1}{k_2}.$$

Використовуючи (19) та (11), можна визначити коефіцієнт відбивання для гетероструктури:

$$R = \frac{\frac{\xi_1^2}{\xi_2^2} \left[ \frac{m_2^2 k_1^2 \xi_2^2}{m_1^2 k_2^2 \xi_1^2} - 1 \right]^2 \sin^2 k_2 L}{4 \frac{m_2^2 k_1^2}{m_1^2 k_2^2} + \frac{\xi_1^2}{\xi_2^2} \left[ \frac{m_2^2 k_1^2 \xi_2^2}{m_1^2 k_2^2 \xi_1^2} - 1 \right]^2 \sin^2 k_2 L} \quad (21)$$

$$\frac{\beta_1^2}{\beta_2^2} = \frac{\xi_1}{\xi_2}$$

для надбар'єрного руху електрона  
 $(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} = V_0 + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2}, \text{ де } V_0 - \text{розрив зон}), \text{ та}$

$$R = \frac{\frac{\xi_1^2}{\xi_2^2} \left[ \frac{m_2^2 k_1^2 \xi_2^2}{m_1^2 \chi^2 \xi_1^2} + 1 \right]^2 \sin^2 \chi L}{4 \frac{m_2^2 k_1^2}{m_1^2 \chi^2} + \frac{\xi_1^2}{\xi_2^2} \left[ \frac{m_2^2 k_1^2 \xi_2^2}{m_1^2 \chi^2 \xi_1^2} + 1 \right]^2 \sin^2 \chi L} \quad (22)$$

для підбар'єрного проходження електрона  
 $(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} = V_0 - \frac{\hbar^2 \chi^2}{2m_2}).$

## II. Конкретні розрахунки. Аналіз одержаних результатів

Враховуючи те, що останнім часом гетероструктури типу *GaAs/AlAs/GaAs* та *AlAs/GaAs/AlAs* знайшли широке використання в якості систем, де експериментально і теоретично досліджується тунелювання електронів та дірок [1-4], використаємо розглядувану модель до гетеросистеми *GaAs/AlAs/GaAs*. Для цього необхідно, знаючи відомі параметри: ефективні маси, сталі ґратки та розрив зон, встановити параметри задачі:  $P_1, P_2, \xi_1, \xi_2$ .

З дисперсійного рівняння (5), можна визначити екстремальні значення даних енергій при  $k_i \rightarrow 0$ . Будемо вважати, що в гетеросистемі на межі поділу не виникає додаткових полів і потенціальна енергія електрона не змінюється ( $V_+ = 0$ ). Тоді для обох типів кристалів ( $i = 1, 2$ ) екстремальні значення енергії визначаються з наступних рівнянь:

$$\operatorname{tg} \sqrt{\frac{m_0 d_i^2}{2\hbar^2}} E_n = - \frac{U_i}{\sqrt{\frac{m_0 d_i^2}{2\hbar^2}} E_n}, \quad n = 1, 3, 5, \dots,$$

$$\sin \sqrt{\frac{m_0 d_i^2}{2\hbar^2}} E_n = 0, \quad n = 2, 4, 6, \dots$$

Можна також визначити ефективні маси для непарних та парних енергетичних зон:

$$\frac{m_n}{m_0} = - \frac{2\hbar^2 U_i}{m_0 d_i^2 E_n} \left[ 1 - \frac{2U_i}{\frac{m_0 d_i^2}{2\hbar^2} E_n + U_i^2} \right], \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

$$\frac{m_n}{m_0} = - \frac{U_i}{\pi^2 n^2}, \quad n = 2, 4, 6, \dots$$

На рис. 2 подано закон дисперсії для двох кристалів; ефективна маса та розрив для третіх зон ( $n = 3$ ) відповідає відомим даним кристалів *GaAs* та *AlAs*  
 $(d_1 = 5,653 \text{ \AA}, m = 0,066m_0 - \text{GaAs};$

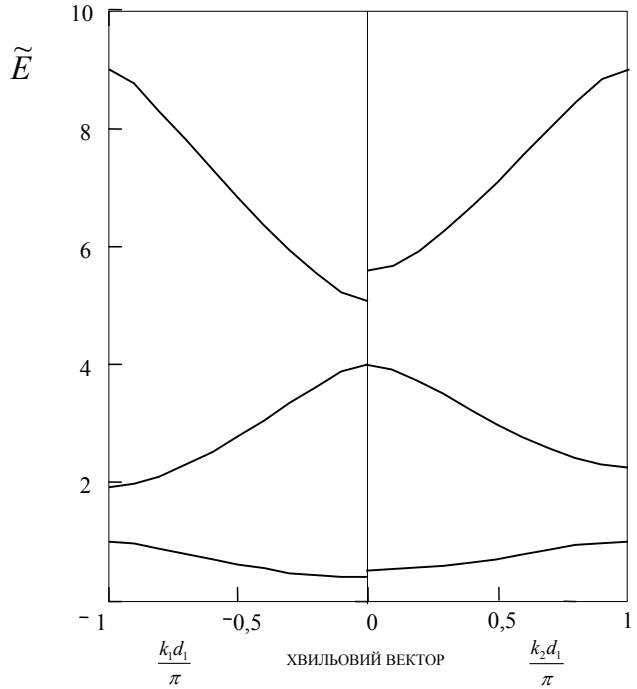


Рис. 2. Закон дисперсії для кристалів *AlAs* та *GaAs*.  
 $(\tilde{E} = (\pi^2 \hbar^2 / 2md_1^2) \cdot E).$

$d_2 = 5,66 \text{ \AA}, m = 0,124m_0 - \text{AlAs}, V_0 = 570 \text{ meV})$

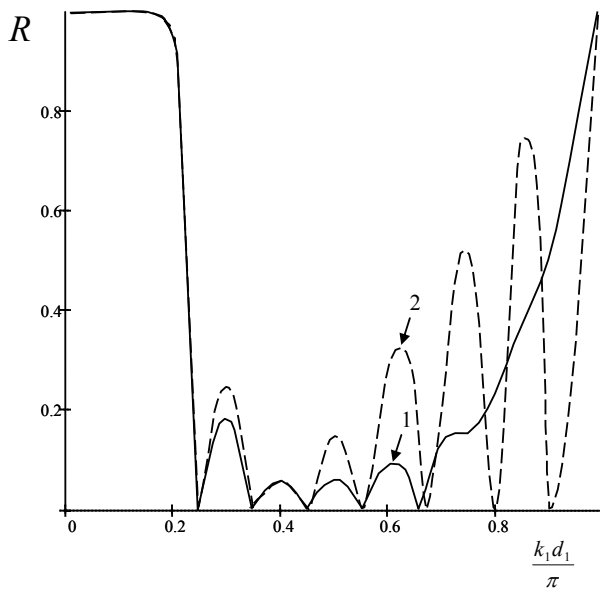
. Даний спектр реалізується, якщо

$$U_1 = \frac{\hbar^2}{m_0 P_1 d_1} = -3,01, \quad U_2 = \frac{\hbar^2}{m_0 P_2 d_2} = -4,79.$$

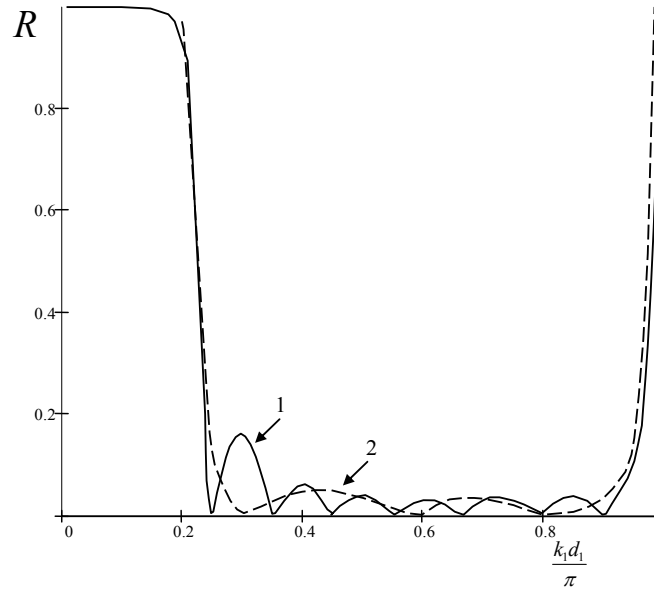
Маючи необхідні параметри, можна визначити коефіцієнт відбивання  $R$  чи пропускання  $T$  для гетеросистеми на основі кристалів *GaAs* та *AlAs*.

На рис. 3 подано залежність коефіцієнту  $R$  від безрозмірного хвильового вектора падаючого на бар'єр електрона для гетеросистеми *GaAs/AlAs/GaAs*. Коефіцієнт відбивання  $R$  обчислено за формулами (10) та (11). Видно, що залежність  $R = R(k_1)$  складається з двох областей – підбар'єрного та надбар'єрного розсіювання. В першій області залежність є монотонною. При малих  $k_1$  коефіцієнт відбивання близький до одиниці і зменшується при збільшенні хвильового вектора. В надбар'єрній області функція  $R = R(k_1)$  є осциляційною. Для кожного значення ширини бар'єру  $L$  чітко визначеними є точки, при яких спостерігається ідеальне пропускання, тобто  $R = 0$ . Збільшення  $k_1$  веде до зростання середнього значення коефіцієнту відбивання, який досягає максимального значення при  $\frac{k_1 d_1}{\pi} = 1$ .

Крім того, коефіцієнт відбивання електронів суттєво залежить від величин  $b_1$  та  $b_2$ , які є наслідком порушення величин сталих ґраток біля межі поділу гетеросистеми. Зміна цих величин веде як до зміни локальних максимумів в залежності



**Рис. 3.** Коефіцієнт відбивання електронів для системи з трьох кристалів *GaAs/AlAs/GaAs*.  $U_1 = -3,01$ ,  $U_2 = -4,79$ . Крива 1 – відповідає випадку  $b = b_1 + b_2 = d_2$  ( $b_1 = 0,1d_2$ ,  $b_2 = 0,9d_2$ ). Крива 2 – для випадку  $b = b_1 + b_2 = 2d_2$  ( $b_1 = 0,1d_2$ ,  $b_2 = 1,7d_2$ ).



**Рис. 4.** Коефіцієнт відбивання електронів для системи з трьох кристалів *GaAs/AlAs/GaAs*.  $U_1 = -3,01$ ,  $U_2 = -4,79$ . Крива 1 – точний розв'язок для  $b = (d_1 + d_2)/2$ , крива 2 – наближений розв'язок.

$R = R(k_1)$ , так і до їх зсуву.

Якщо порівняти результати  $R = R(k_1)$ , одержані за формулою (10) (точний розв'язок) та формулою (15) (наближений розв'язок), то легко бачити, що при великих значеннях  $L$  ( $L > 5d_2$ ), якісно обидві формули дають близькі результати. Проте, як видно з рис. 4, (навіть при  $L = 8d_2$  та за умови, що точна функція досить гладка:  $2(b_1 + b_2) \cong d_1 + d_2$ ) максимуми та мінімуми у надбар'єрній області не збігаються навіть за кількістю.

Перейдемо до аналізу коефіцієнту відбивання  $R = R(k_1)$ , отриманого на основі наближення огинаючих та наближення ефективної маси, уточненого використанням граничних умов Гарісона. Розглянемо особливий випадок поверхні, коли комірка, що містить атоми обох кристалів має наступний розмір  $b = \frac{d_1 + d_2}{2}$  (цей тип поверхні відповідає гетероструктурам з близькими сталими ґратки). Для даного випадку можна встановити точне значення підгоночних параметрів  $\xi_i \equiv \beta_i^2$ ,  $i = 1, 2$  через параметри кристалів та енергію електрона на дні зони:

$$\xi_{1,2} = \frac{U_{1,2}}{(q_n d_{1,2})^2} \frac{m_0}{m_{1,2}}, \quad q_n = \sqrt{\frac{2m_0 E_n}{\hbar^2}} \quad (23)$$

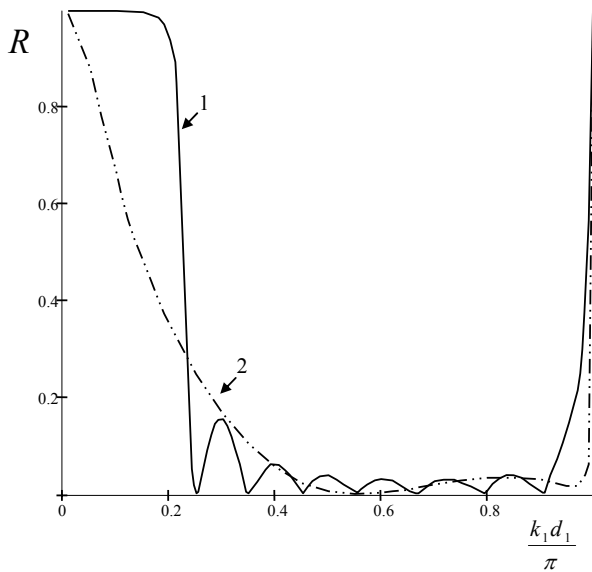
З даної формули видно, що для вищих зон, коли  $q_n d_{1,2} \gg |U_{1,2}|$ , величини  $\xi_i$  прямують до одиниці, і формула (21) переходить в формулу для коефіцієнта відбивання, отриману в наближенні огинаючих

функцій, коли  $\Phi$  та  $\frac{1}{m} \frac{\partial \Phi}{\partial x}$  – неперервні  $\left( \frac{\xi_1}{\xi_2} = 1 \right)$ .

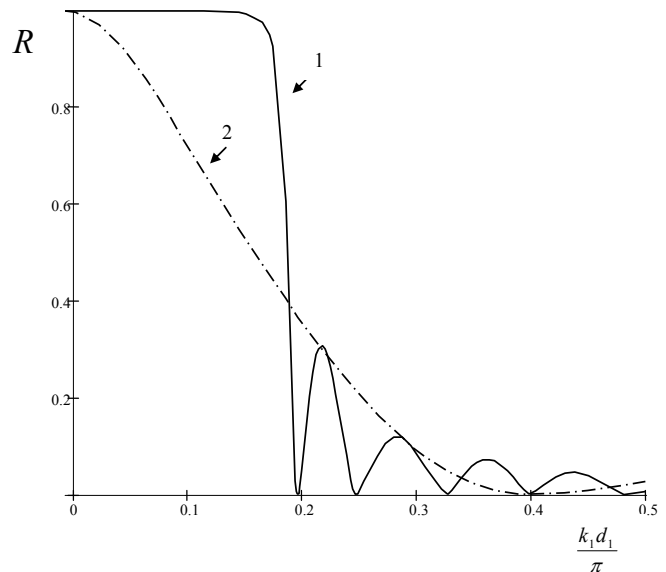
Для складових кристалів даної гетеросистеми *GaAs* та *AlAs* були отримані наступні точні значення:  $\xi_1 = 0,908$ ,  $\xi_2 = 0,768$ , що дало можливість порівняти результати, отримані за допомогою методу ефективної маси, з точним розв'язком.

На рис. 5 та рис. 6 подано коефіцієнт відбивання  $R = R(k_1)$ , обчислений за формулою (11) – точний розв'язок та формулою (21) – метод ефективної маси, уточнений граничними умовами Гарісона, відповідно для різної ширини бар'єру. Видно, що в області малих значень хвильового вектора  $k_1 \rightarrow 0$ , де є застосовним метод ефективної маси, маємо добре якісне співпадіння отриманих результатів. При подальшому збільшенні  $k_1$  відмічається зсув точок, при яких спостерігається ідеальне пропускання електронів ( $R = 0$ ) та невідповідність величин максимумів в надбар'єрній області. Однак, потрібно відмітити, що ця розбіжність є значно меншою, ніж при порівнянні точного розв'язку та результатів, отриманих за допомогою методу ефективної маси для випадку  $\xi_{1,2} = 1$ . З наведених графіків видно, що із зменшенням ширини бар'єру коефіцієнт пропускання електронів збільшується як в підбар'єрній так і в надбар'єрній області, що було очікуваним з фізичних міркувань.

Отже, можна зробити висновок, що для даного типу поверхні, який відповідає гетероструктурам з близькими сталими ґратки, крайові умови Гарісона є застосовними і дають добрі результати.



**Рис. 5.** Коефіцієнт відбивання електронів для системи  $GaAs/AlAs/GaAs$  (точний розв'язок). Крива 1 –  $L=8d_2$  (45,28 Å), крива 2 –  $L=2d_2$  (11,32 Å).



**Рис. 6.** Коефіцієнт відбивання електронів для системи  $GaAs/AlAs/GaAs$ , обчислений методом ефективної маси з застосуванням умов зшивання Гарісона для  $b=(d_1+d_2)/2$ . Крива 1 –  $L=8d_2$  (45,28 Å), крива 2 –  $L=2d_2$  (11,32 Å).

Таким чином, в роботі на основі моделі Кроніга-Пенні з  $\delta$ -подібними потенціалами досліджено тришарову наногетероструктуру, в якій біля меж поділу існує перехідний шар, відстань між крайніми атомами якого є параметром задачі і може змінюватись від нуля до двох сталих ґраток кристалів.

Отримана точна формула для коефіцієнта відбивання, з якої можна визначити залежність коефіцієнта  $R$  від хвильового вектора, величини

перехідного шару та ширини моношару гетероструктури.

Конкретні обчислення, проведені для гетеросистеми  $GaAs/AlAs/GaAs$ , показали, що використання наближення огинаючих та методу ефективної маси при малих значеннях хвильового вектора дає непогані результати, якщо використати граничні умови Гарісона при відповідним чином підібраних параметрах.

- [1] Ф. Караваев, В.Н. Чернышов, Резонансное тунелирование X-электронов в структурах  $AlAs/GaAs(111)$ . Псевдопотенциальный расчет и модель // *ФТП*, **35**(105), сс. 105-109 (2001).
- [2] Е.Н. Морозова, О.Н. Макаровский, В.А. Волков и др. Резонансное тунелирование дырок в двобарьерных структурах с квантовыми точками  $InAs$  в центре квантовой ямы  $GaAs$ . // *ФТП*, **39**(573), сс. 573-576 (2005).
- [3] Е.Е. Вдовин, Ю.Н. Ханин. Анизотропия эффективной массы  $\Gamma$ -электронов в квантовой яме  $GaAs/(AlGa)As$  // *ФТП*, **39**(445), сс. 445-452 (2005).
- [4] Е.Е. Вдовин, Ю.Н. Ханин, Ю.В. Дубровский. Резонансное  $\Gamma-X$ -тунелирование в однобарьерных гетероструктурах  $GaAs/AlAs/GaAs$  // *ФТП*, **38**(436), сс. 436-447 (2004).
- [5] W.A. Harrison. Tunneling from an Independent-Particle Point of View // *Phys. Rev.*, **123**(85), pp. 85-89 (1961).
- [6] E. Caruthers and P.J. Lin-Chung. Pseudopotential calculations for  $(GaAs)_1-(AlAs)_1$  and related monolayer heterostructures // *Phys. Rev. B.*, **17**(6), pp. 2705-2718 (1978).
- [7] G.A. Sai-Halasz, L. Esaki and W. Harrison. InAs-GaSb superlattice energy structure and its semiconductor-semimetal transition // *Phys. Rev. B.*, **18**(6), pp. 2812-2818 (1978).
- [8] G.C. Osbourn and P.L. Smith. Transmission and reflection coefficients of carriers at an abrupt GaAs-GaAlAs (100) interface // *Phys. Rev. B.*, **19**(4), pp. 2124-2133 (1979).
- [9] A. Grinberg and S. Luryi. Electron transmission across an interface of different one-dimensional crystals // *Phys. Rev. B.*, **39**(11), pp. 7468-7475 (1989).
- [10] A.F.J. Levi and T.H. Chiu. Quantum reflections and inelastic scattering of electrons in semiconductor heterostructures // *Solid-State Electronics*, **31**(3/4), pp. 625-628 (1988).
- [11] W. Trzeciakowski. Effective-mass approximation in semiconductor heterostructures: One-dimensional analysis // *Phys. Rev. B.*, **38**(17), pp. 12493-12507 (1988).

- [12] D.J. Ben Daniel and C.B. Duke. Space-Charge Effects on Electron Tunneling // *Phys. Rev.*, **152**(6), pp. 683-692 (1966).
- [13] R.A. Morrow and K.R. Brownstein. Model effective-mass Hamiltonians for abrupt heterojunctions and the associated wave-function-matching conditions // *Phys. Rev. B.*, **30**(17), pp. 678-680 (1984).
- [14] G. Bastard. Superlattice band structure in the envelope-function approximation // *Phys. Rev. B.*, **24**(10), pp. 5693-5697 (1981).
- [15] Q.-G. Zhu and H. Kroemer. Interface connection rules for effective-mass wave functions at an abrupt heterojunction between two different semiconductors // *Phys. Rev. B.*, **27**(6), pp. 3519-3527 (1983).
- [16] M. Altarelli. Electronic structure and semiconductor-semimetal transition in InAs-GaSb superlattices // *Phys. Rev. B.*, **28**(2), pp. 842-845 (1983).
- [17] І.О. Вакарчук. *Квантова механіка*. Львів, Львівський університет, 784 с. (2004).
- [18] N.Vu. Kmirovic, D. Indjin, V.D. Jovanovic, Z. Ikonc and P. Harrison. Symmetry of  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  Hamiltonian in pyramidd *InAs/GaAs* quantum dots: Application to the calculation of electronic structure // *arXiv: cond-mat/05.05607*, **1**, pp. 1–17 (24 may 2007).
- [19] В.И. Бойчук, И.В. Билынский. Исследование интерфейсных поляронных состояний простой гетероструктуры полупроводников // *Физ. тверд. тела*, **37**(3), сс. 1016-021 (1995).
- [20] В.И. Бойчук, Р.Ю. Кубай. лияние промежуточного слоя с переменной от координаты диэлектрической проницаемостью на энергию основного состояния электрона в сферической сложной наногетеросистеме // *Физ. тверд. тела*, **43**(2), сс. 226-232 (2001).
- [21] Н.В. кач, Р.Б. артушинский. лияние фононов на электронный спектр в полупроводниковых малоразмерных квантовых точках, помещенных в диэлектрическую среду // *Физ. тверд. тела*, **45**(7), сс. 284-291 (2003).

V.I. Boichuk, I.V. Bilynsky, I.O. Shakleina

## The Dispersion of the Coefficient of Reflection from the Interface of a One-Dimensional Crystal Heterosystem

*Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University,  
24, Ivan Franko Str., Drohobych, UA-82100, Ukraine,  
e-mail: ioshak@mail.ru*

In the paper a three-layer nanoheterostructure with a transitive layer at the separation boundaries is described by a Kronig-Penney model with  $\delta$ -function potentials. The distance between the farthest atoms of the transitive layer is a parameter of the problem and ranges from zero to two lattice parameters of crystals. An exact solution is obtained for the reflection coefficient  $R$  which makes it possible to determine the dependence of the factor on a wave vector, widths of a transitive layer and a monolayer of the nanoheterostructure. The specific calculations performed for the *GaAs/AlAs/GaAs* heterosystem showed that the envelope-function approximation and the effective mass method at small values of a wave vector yields quite good results provided the Harrison boundary conditions are used with appropriately chosen parameters.